

CRDS-FY2019-SP-02

戦略プロポーザル

未来材料開拓イニシアチブ

～多様な安定相のエンジニアリング～

STRATEGIC PROPOSAL

Future Materials Exploring Initiative

- Engineering for Diverse Stable Phases -



国立研究開発法人 科学技術振興機構 研究開発戦略センター
Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

研究開発戦略センター（CRDS）は、国の科学技術イノベーション政策に関する調査、分析、提案を中立的な立場に立つて行う公的シンクタンクの一つで、文部科学省を主務省とする国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）に属しています。

CRDSは、科学技術分野全体像の把握（俯瞰）、社会的期待の分析、国内外の動向調査や国際比較を踏まえて、さまざまな分野の専門家や政策立案者との対話を通じて、「戦略プロポーザル」を作成します。

「戦略プロポーザル」は、今後国として重点的に取り組むべき研究開発の戦略や、科学技術イノベーション政策上の重要課題についての提案をまとめたものとして、政策立案者や関連研究者へ配布し、広く公表します。

公的な科学技術研究は、個々の研究領域の振興だけでなく、それらの統合によって社会的な期待に応えることが重要です。「戦略プロポーザル」が国の政策立案に活用され、科学技術イノベーションの実現や社会的な課題の解決に寄与することを期待しています。

さらに詳細は、下記ウェブサイトをご覧ください。
<https://www.jst.go.jp/crds/>

エグゼクティブサマリー

「未来材料開拓イニシアチブ ～多様な安定相のエンジニアリング～」とは、材料創製の探索範囲をこれまで人類が扱ってこなかった未開拓の領域まで大きく拡大することで、高性能・高機能化、複数機能の共存、相反する機能の両立などの材料に対する高度化した要求に応えうる未来材料を創製するための研究開発戦略である。ここでは、材料の多元素化やハイエントロピー化、準安定相などの多種多様な安定相（熱力学的にエネルギーの最も低い安定相〔最安定相〕だけでなく準安定相も含む広義の意味）の利用、熱力学的には不安定な構造でもプロセス制御手段を用いて安定化させるなど、新たな材料創製手法に果敢に取り組む。これにより、新たな材料設計・プロセス設計の指針および学理の構築を行い、材料創製の大きなパラダイムシフトを起こすことを目指す。

近年、CO₂削減に向けた再生可能エネルギーの大量導入や高度なエネルギーマネジメント、自動運転に代表される快適なモビリティやIoT/AIなどの利用による Society 5.0 の実現、製品の製造・使用過程における環境負荷の低減などの様々な社会的要請に応えるべく、材料・デバイスの高性能化・高機能化に対する要求や期待がますます高まってきている。例えば、超軽量素材では高強度かつ高靱性、熱電材料では高電気伝導かつ低熱伝導、といった複数の機能の共存や相反する機能の両立などが、さらなる高性能化とともに要求されるようになってきている。これらの機能材料開発に対する高度な要求に対し、それぞれの応用分野における単純な元素構成、実現容易な安定相の利用など従来の材料探索範囲での新材料開発は困難になってきている。このため、未知なる可能性を秘めている複雑な組成や未利用安定相の活用など未開拓の材料群へ対象を広げていくことが必要である。また、材料開発競争の激化から、新材料の探索から実際の材料作製に至る材料設計や作製プロセス設計も含めた開発期間の短縮も求められており、応用分野を越えた新材料創製の新たな指針の構築が必要になってきている。

一方、第一原理計算や、ビッグデータ解析、機械学習、ベイズ推定などのデータ科学を利用して効率的な材料設計を行うマテリアルズ・インフォマティクスや、同時に多様な組成の材料を作製するコンビナトリアル手法、ロボットなどの利用による効率的な実験（ハイスループット実験）が最近発展してきている。このような新たな研究手法を活用することで、従来の実験手法では取り組みが困難だった未開拓の材料に対しても、目的の機能を有する組成・構造の選択や、それを安定な材料として実現する作製プロセスの構築を効率的に行うことが可能になると考えられる。このため、新材料開発への高度な機能要求に対して、探索範囲を未開拓の材料群へと大きく広げ、そこでの材料創製に挑戦していくべきである。

今後取り組むべき研究開発課題としては、材料探索範囲の拡大、作製プロセス中の反応過程の可視化と反応経路の動的制御、プロセス制御手段の利用による目的安定相の実現があり、具体的には以下の研究開発を行っていく。

(1) 材料探索範囲の拡大

材料の基本的な特性・機能に大きな影響を与える構成元素、結合状態などの主要因子の役割、さらには複数の元素間の役割分担、添加元素の補完的役割などの明確化が必要である。このような各要素の役割を明確にするためには、理論計算やデータ科学によるマテリアルズ・インフォマティクスの利用とともに、ハイスループット実験の活用が重要である。また、作製プロセス中に

おける、原料、前駆体、添加元素、多元素化によるエントロピーの増大、歪みなどの反応経路に関わる役割の明確化も重要である。

ここで得られた各種のデータや機械学習などで分析した結果は、個々の材料の応用分野を越えて活用できるようにデータベース化して共有するとともに、研究者が論理的に理解し、モデル化してシミュレーション等に利用できる形にするために、主要因子を抽出してその役割や効果を学理として体系化していくことが重要である。さらに、応用分野を横断して新たな安定相を探索・設計する新たな指針を構築していくことが望まれる。

(2) 作製プロセス中の反応過程の可視化と反応経路の動的制御

目的の安定相を自在に作製するには、反応生成物、雰囲気、相変化などをその場での観測・計測（オペランド計測）で可視化し状況を把握することが重要である。このようなオペランド計測を可能とするプロセス装置の開発、反応生成物や反応雰囲気を検出できるその場観測装置、安定相のダイナミックな変化をトレースできる測定技術の開発が必要である。また、オペランド計測での可視化が難しい部分については、反応の理論計算や、これまでに蓄積されたプロセス関連のデータから反応機構を推定して補完することが望まれる。

これらの技術および測定データを基に、様々な条件下での反応過程と安定相のダイナミックな変化を科学的に理解し、反応過程と安定相変化を統合して扱う新たな学理として整理していくことが重要である。さらに、反応過程の途中で他の安定相が優先的に出現する傾向が強い場合などでも、目的の安定相を得るための反応経路を探索し、精密な制御手法の開発を行う必要がある。

(3) プロセス制御手段の利用による目的安定相の実現

安定相の中には、他の安定相とのエネルギーバリアが低く、使用環境では不安定になるものも存在するため、目的の安定相をさらに安定化させる手法の構築も必要である。例えば、特定の結晶面を持つ結晶基板によりエピタキシャル成長の原子配列を強制的に揃えたり、高温・高圧の状態から急激に温度や圧力を下げたりするなど、プロセス制御手段を活用して目的の安定相を実現することも重要である。

上記で述べた研究開発を推進していくためには、材料設計から作製プロセス設計（反応経路設計）、オペランド計測、特性評価、データ科学活用などの統合的な研究開発を行う必要がある。特に、応用分野を横串的に見て、新たな材料設計・プロセス設計の指針を得ることが重要であり、これを強く意識して全体をまとめるリーダーの下で、研究を推進していくことが望まれる。このような研究は、関係する研究機関に跨がるネットワーク的な体制でも可能であるが、計測機器や作製プロセス装置などの開発や、多様な分野に跨がる人材の育成、効率的な研究開発を行う観点では、研究拠点の構築が望まれる。大学や国研における様々な基礎分野の研究者に加え、応用分野の様々な課題を知る産業界の研究者・技術者も参加することで、学術的な研究と応用に向けた研究の両方を知る人材の育成が期待される。

未開拓の材料への探索範囲拡大や多様な安定相を動的制御して新機能材料を創製するという考え方は世界的に見てもまだ断片的な活動しかなく、我が国において早急にこの研究領域を立ち上げていくことが重要である。このためには、材料設計、プロセス設計、計測、データ科学などに跨がる新たなコミュニティの形成とともに、この研究開発を加速する施策の早期実施が必要である。

Executive Summary

The “Future Materials Exploring Initiative - Engineering for Diverse Stable Phases -” is an R&D strategy aimed at exploring materials which meet with sophisticated requirements such as improved performance and functionality, coexistence of multiple functions, and compatibility of conflicting functions, by substantial expansion of scopes for materials search into areas that have never been explored. Here, we boldly pursue novel methods for creation of materials, using diverse techniques such as an increase of number of constituent elements, high-entropy effect, utilization of diverse stable phases including metastable ones, and process control to stabilize thermodynamically unstable structures. We expect a large paradigm shift in materials creation by formulating guidelines and principles for design of new materials and processes through above-mentioned efforts.

In recent years, there is a growing demand and expectations for higher performance and advanced functionality of materials and devices to cope with diverse social requirements. These include the massive introduction of renewable energy and advanced energy management aimed at reducing CO₂, the realization of Society 5.0 through comfortable mobility with autonomous driving and utilization of IoT/AI, and the lessening of a product’s environmental impact during manufacturing and at their use. In addition to better performance, there is currently a need to achieve the coexistence of multiple functions and the compatibility of conflicting functions, such as achieving high strength and toughness in ultra-lightweight materials and high electrical conduction with low heat conduction in thermoelectric conversion materials.

However, it becomes progressively difficult to develop new materials in the respective application fields within the traditional scope of material-design using simple element configurations or the easily realized stable crystalline phases. Therefore, the target of our research must be expanded to include unexplored materials with complex compositions and unexplored stable phases that hold unknown potential. Further, recent intensified competition in materials development strongly requires reduced development period for both materials design and manufacturing processes, covering materials research and actual production. Therefore, it becomes important to formulate new guidelines for new materials creation across different application fields.

In addition, recent developments in materials informatics (MI) should be paid attention for efficient materials design. They include data sciences such as first-principles calculations, big data analysis, machine learning, and Bayesian inference, as well as efficient experiments (high-throughput experiments) utilizing robots and combinatorial approaches toward simultaneously manufacturing materials with diverse compositions. Application of these new approaches to researches of unexplored materials which have been difficult to obtain with conventional experiment methods is expected to lead to efficient selection of composition and

structure with the target function as well as efficient formulation of a manufacturing process for production of a stable material meeting these requirements. Therefore, it is required to expand the research areas for materials creation to unexplored materials groups to meet with requirements for sophisticated functions, and challenge is required for new materials production in the expanded area.

Future R&D challenges include expanding the scope of material search, visualizing reaction processes and dynamically controlling reaction pathways throughout the manufacturing process, and achieving a target stable phase through the use of process control means. The following is a description of the R&D that should be conducted.

(1) Expanding the scope of material search

We must clarify the roles of such primary factors as constituent elements and bonding states that have a great effect on the basic properties and functions of materials, as well as the role of each element among multiple-elements structures and the complementary roles of added elements. The use of theoretical calculations and materials informatics and the application of high-throughput experiments will be essential for clarifying the roles of these factors. Also important is the clarification of roles in the manufacturing process related to reaction pathways, such as raw materials, precursors, additive elements, increased entropy due to an increased number of elements, strain, and the like.

We must share the various data obtained through these efforts and the results of analysis through machine learning and other means in the form of a database that can be used beyond the fields of application. It is important to extract the primary factors and organize their roles and effects as scientific principles in order to present these results in a form that researchers can logically comprehend, model and use in simulations. Moreover, it will be desirable to formulate new guidelines for investigating and designing new stable phases across all areas of application.

(2) Visualizing reaction processes and dynamically controlling reaction pathways during the manufacturing process

Visualization in in-situ observations and measurements (operando measurements) to grasp the state of the reaction product, atmosphere, phase transitions, and the like is essential for producing target stable phases at will. We must develop process equipment with the capability for such operando measurements, in-situ monitoring equipment capable of detecting the reaction product and atmosphere, and measurement techniques capable of tracing dynamic changes in the stable phases. Areas that are difficult to visualize in operando measurements should be complemented with theoretical calculations of reactions and estimations of reaction mechanisms from process-related data accumulated to date.

It is essential to understand the reaction process under various conditions and dynamic changes in stable phases from a scientific perspective using these technologies and measurement data and to formulate new scientific theories that treat the reaction processes and changes in stable phases integrally. Even when there is a strong tendency for other stable phases to appear preferentially during the reaction process, we need to explore reaction pathways for acquiring the target stable phase and develop precise-control approaches.

(3) Achieving the target stable phase through use of process control means

Since some materials in a stable phase may become unstable in the operating environment due to low energy barriers to other stable phases, an approach toward further stabilizing the target stable phase must be formulated. Applying process control means, such as forcibly arranging atoms during epitaxial growth using a crystal substrate that possesses specific lattice constant and surface structure, or rapidly lowering the temperature and pressure from a high-temperature, high-pressure state, is effective in some cases for achieving the target stable phase.

Implementing the R&D described above will require integrated R&D from materials design to manufacturing process design (reaction pathway design), operando measurements, property evaluation, and data science. It will be particularly important to acquire guidelines for new materials design and process design that transcend the fields of application. The research should be carried out under a leader overseeing the entire operation with this goal firmly in mind. While such research may be conducted through a network-like arrangement connecting all research institutes involved, the formation of research centers is more preferable from the viewpoint of developing measurement equipment and manufacturing process equipment, nurturing interdisciplinary personnel, and conducting efficient R&D. By including researchers and technicians of industries versed in the various challenges of application fields and also researchers in various basic fields at universities and national research institutes, we hope to train human resources that are familiar with both academic research and application-oriented research.

An approach to creating new functional materials by expanding the scope of material search into unexplored materials and dynamically controlling various stable phases remains disjointed even from a global perspective. It is important that we establish these research areas promptly in Japan. To so do, we must form new communities spanning materials design, process design, measurements, and data science and expedite the enactment of policies aimed at accelerating this R&D.

目 次

エグゼクティブサマリー.....	i
Executive Summary	iii
1. 研究開発の内容.....	1
2. 研究開発を実施する意義.....	5
2－1. 現状認識および問題点.....	5
2－2. 社会・経済的効果.....	6
2－3. 科学技術上の効果.....	10
3. 具体的な研究開発課題.....	12
3－1. 材料探索範囲の拡大.....	12
3－2. 作製プロセス中の反応過程の可視化と反応経路の動的制御.....	14
3－3. プロセス制御手段の利用による目的安定相の実現.....	16
4. 研究開発の推進方法および時間軸.....	17
4－1. 材料設計、プロセス設計、計測、データ科学に跨がる統合的研究推進.....	17
4－2. 時間軸.....	19
付録1. 検討の経緯.....	22
付録2. 国内外の状況.....	25
付録3. 専門用語説明.....	27

1. 研究開発の内容

「未来材料開拓イニシアチブ ～多様な安定相のエンジニアリング～」とは、材料創製の探索範囲をこれまで人類が扱ってこなかった未開拓の領域まで大きく拡大することで、高性能・高機能化、複数機能の共存、相反する機能の両立などの材料に対する高度化した要求に応えうる未来材料を創製するための研究開発戦略である。ここでは、これまでのような熱力学的に最安定な構造（最安定相）や取り扱い易い構造（安定相）だけでなく、未利用の安定相や普通の状態では不安定な相までも利用可能にする材料創製のパラダイムシフトあるいは破壊的イノベーションを起こすことを目指している。具体的には、多様な安定相の中から、目的とする機能を有する安定相を探索・設計し、安定した材料として使えるようにする作製プロセスの精密な設計・制御を可能とする新たな指針やコンセプトの創出などを行う。

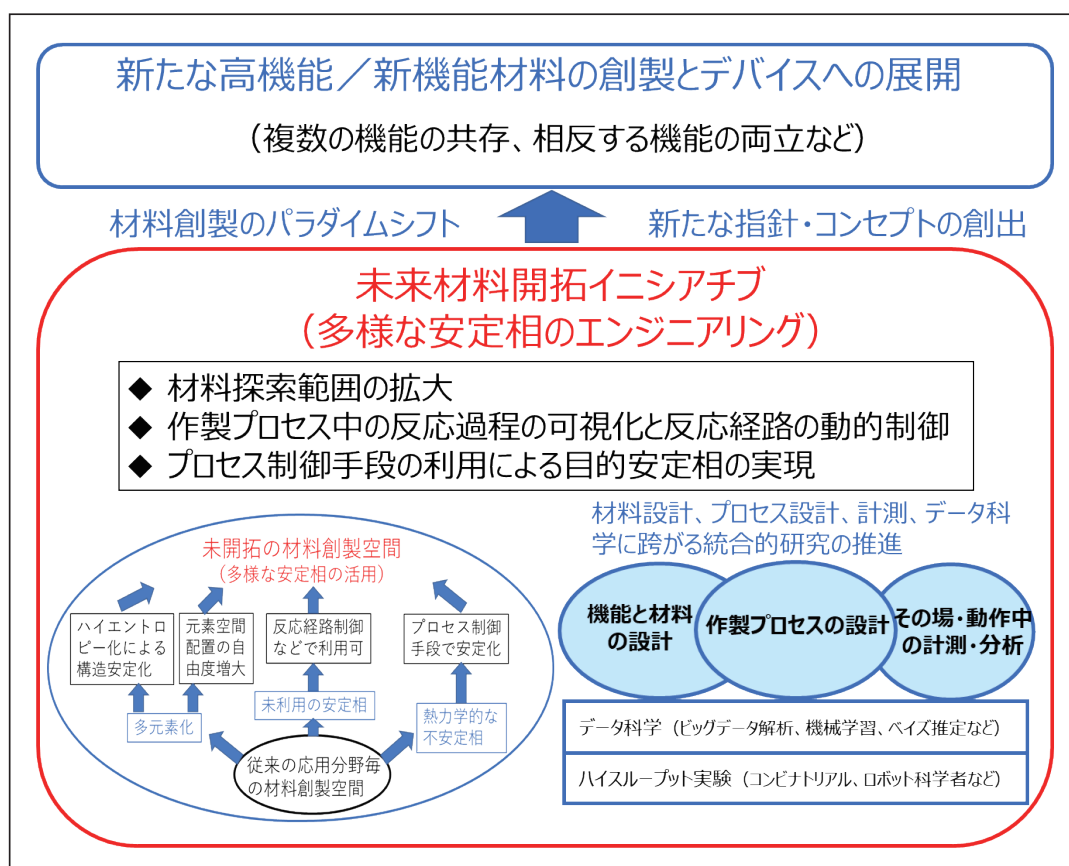


図 1-1 本提案の概略

図 1-1 に本提案の研究開発の概略を示す。エネルギー、環境、モビリティ、IoT などに関する様々な社会的問題の解決およびデバイスへの展開に向け、新たな高機能／新機能材料の開発が期待されている。特に近年では、高強度かつ高靱性、高電気伝導かつ低熱伝導などのような複数の機能の共存、相反する機能の両立などこれまで以上に高度な機能が要求されるようになっている。しかし、それぞれの応用分野における単純な元素構成、最安定相や実現容易な安定相の利用など従来の材料探索範囲（空間）はすでに多くの開発が行われており、新材料開発は限界に近づいている。このため、未知の可能性を秘めている複雑な組成や、準安定相を含む多様な安定相を活用す

るなど、未開拓の材料群へ対象を大きく広げていくことが必要になってきている。以下に本提案による取り組むべき研究開発課題を示す。

(1) 材料探索範囲の拡大

多元素化により元素の空間配置の自由度を増大させ複雑な組成・構造を生み出すことや、多種類の等量の元素による配置のエントロピー増大（ハイエントロピー化）を活用した多様な局所構造の形成、これまで活用されてこなかった安定相の利用、熱力学的に不安定な相（不安定相）の安定化などにより、多様な安定相の利用へと従来の材料探索範囲を大きく拡大することが重要である。これにより、新たな機能材料開発の可能性を大幅に高め、そこでの材料創製研究を進めることが望まれる。

このような未開拓の材料探索空間においては、材料の基本的な特性・機能に大きな影響を与える特定の安定相における構成元素、結合状態、多元素化、微量な添加元素などの役割の明確化が必要である。このためには、理論計算やデータ科学によるマテリアルズ・インフォマティクスとともに、最近の進展が著しいコンビナトリアル手法やロボット科学者（実験を補助するインテリジェントなロボット）の利用などのハイスループット実験が重要である。

また、作製プロセス中における、原料、前駆体、添加元素、多元素化によるエントロピーの増大（ハイエントロピー効果）、歪みなどの反応経路に関わる役割の明確化も重要である。ここでも、ハイスループット実験やデータ科学の活用は重要である。

これらの安定相の特性・機能や作製プロセス中での各要素の役割や効果の明確化を進めていく中で、得られた各種のデータや機械学習などで分析した結果は、応用分野を越えて活用できるようにデータベースにして共用化することが重要である。また、人間が論理的に理解し、モデル化してシミュレーション等に利用できる形にするために、主要因子を抽出し、これらの役割や効果を学理として体系化していくことが重要である。

さらに、学理としての体系化を通して、応用分野を横断して未開拓の材料探索空間から新たな安定相を探索・設計する新たな指針を構築していくことが重要である。

(2) 作製プロセス中の反応過程の可視化と反応経路の動的制御

目的の特性・機能を有する安定相の作製には、そのプロセス工程（反応経路）の詳細な設計が必要になる。作製プロセス中の反応経路を直接見ることはできないが、反応生成物、雰囲気、相変化などをその場で観測・計測すること（オペランド計測）により、状況のある程度把握することができる。このようなオペランド計測機能を備えた製造プロセス装置の開発、反応生成物や反応雰囲気を検出できるその場観測機器、安定相のダイナミックな変化をトレースできる評価装置の開発や測定技術の開発も重要である。また、反応過程におけるオペランド計測で全ての現象を可視化することは難しいため、不足する情報については反応の理論計算や、これまでに蓄積してあるプロセス関連のデータから反応の特徴を抽出する必要がある。これらにより、反応過程をできるだけ可視化することで、実際に沿ったモデルを構築し、作製プロセス全体のシミュレーションも可能になると考えられる。

オペランド計測、理論計算、プロセスシミュレーションの構築などを基に、安定相の形成における様々な条件下での反応過程と安定相のダイナミックな変化を科学的に理解し、これら反応過程と安定相変化を統合して扱う新たな学理を構築することが重要である。さらに、反応過程の詳細な理解に基づき、目的の安定相を得るための反応経路の精密な制御に関する工学的な手法の開

発を行うことも応用上・産業上で特に重要である。

(3) プロセス制御手段の利用による目的安定相の実現

安定相の中には、特性・機能が魅力的であっても、他の安定相とのエネルギーバリアが低く、使用環境では不安定になるものも存在する。このため、目的の安定相をさらに安定化させる手法の構築も必要である。安定化を促進する方法としては、特定の結晶面を持つ結晶基板によりエピタキシャル成長の原子配列を強制的に揃えたり、材料特性・機能にはあまり影響を与えない微量の添加物を加えたり、高温・高圧の状態から急激に温度や圧力を下げてクエンチ（quench）させる方法などがある。このようなプロセス制御条件を定量的に評価し、安定化促進のための学理として体系化していくことが重要である。

さらに、これらの安定化促進のための手法を開発することが重要である。そのためには、プロセス制御手段として用いる基板、添加物、圧力、温度、前駆体、触媒などの安定化に及ぼす効果や寄与度を定量的に評価しモデル化することや、シミュレーションツールを開発するなど、不安定な相の安定化技術を確立していく必要がある。

上記で述べた研究開発課題に対する研究開発を推進していくためには、多種多様な材料系に対して組成、構造など類似の材料系として大括り化し、材料設計から作製プロセス設計（反応経路設計）、オペランド計測、特性評価、データ科学などの統合的な研究開発を行う必要がある。特に、応用分野を横串的に見て、未開拓の材料探索空間から新たな材料設計・プロセス設計の指針を得ることが重要であり、これを強く意識して全体をまとめていくチームリーダーの下で、技術レイヤー毎のサブチーム、目的の機能材料開発を目指したグループといった縦横の体制で研究を推進し、新たな指針と学理を構築することが望まれる。

このようなチームリーダーを中心とする応用分野を越えた統合的な研究は、関係する研究機関に跨がるネットワーク的な体制でも行うことは可能である。一方、計測機器や作製プロセス装置などの装置開発や、多様な分野に跨がる人材の育成を考慮した効率的な研究開発の観点では、研究拠点の構築が望まれる。この拠点では、独自のオペランド計測の機器や作製プロセス装置などを開発して拠点内で共有化することや、他では得られない独自の実験データや知見を蓄積し共有化することで、新材料創製の効率化が図れるものと期待される。また、大学や国研における様々な基礎分野の研究者が集まるだけでなく、応用分野の様々な課題を知る産業界の研究者・技術者の参加も必要であり、学術的な研究と応用に向けた研究の両方を知る人材の育成が期待される。

このような材料設計と作製プロセスを一体的に考える研究開発の推進に当たっては、理論・シミュレーション、材料設計、プロセス、計測、データ科学に跨る新たな研究コミュニティを形成していく必要がある。そのためには、複数の学会で合同のシンポジウムを開催したり、新たな研究領域の創設を目指した取り組みが必要である。

コラム：ロボット科学者（実験を補助するインテリジェントなロボット）

高機能な新材料の開発においては、研究者は最初に目標となる機能、特性を決め、次に目標を満たしそうな候補材料の組成、構造を予想し、目的の材料を得るまで次の手順を繰り返して開発を進める。

①予想した材料の合成方法（作製プロセス）検討 ⇒②実際に材料を合成（作製）
⇒③作製した材料の特性を測定し機能进行评估 ⇒④評価結果から次の候補材料を検討

ロボット科学者とは、研究者を補助し、この①～④のサイクルを自動化するインテリジェントなロボットのことである。指定の手続きに沿って材料の合成や評価を自動的に行う装置は従来からあるが、ロボット科学者は機械学習などのデータ科学的手法を用いて目標仕様に基づいて材料の組成・構造・合成条件まで予想して自動的に設定し、合成・評価・次の実験条件設定を自動的に繰り返して実行し、目標の成果（材料）を得ることができる。

人間は多次元のパラメータを一度に解析することはできず、2次元ないし3次元にパラメータを集約して実験を繰り返す必要があるが、機械学習では多次元のパラメータと特性との相関を一度に見ることができる。また、実験条件の設定には、研究者による思い込みのようなことは起こらないため、偏りのない探索を行うことができる。また、ベイズ最適化などの手法を用いることで、実験回数を桁違いに少なくすることもでき、人力を遙かに超える速さで新奇材料を創製することや、人間が発見できない材料をロボット科学者が発見することへの期待感が高まっている。

具体的には機械学習で物性予測を行って動く材料合成ロボットが考えられる。材料に対する要求仕様をロボットに入力すると、過去の学習データから材料の組成範囲と合成条件をマテリアルズ・インフォマティクス（MI）に基づいて予測し、合成・物性評価を自動的に行い、評価値と目標値の差に基づいて次の実験の組成、合成条件などを設定して、目標の結果が得られるまで繰り返す。現在のMIでは、目標とする材料特性に対して構造や組成の提案はできるが、合成可否と合成条件（作製プロセスの仕様）は示さない。このため、ロボット科学者の実現には、合成可否予測と合成条件の提案を可能にする必要がある。これには、組成、構造と物性の相関データに加え、プロセスパラメータも蓄積する必要があり、プロセス実験時の各種データを自動蓄積するための装置化が求められる。また、機械学習は与えられたデータの範囲内での学習と推論を行うため、良い結果が得られたときだけでなく、失敗したときのデータも全て蓄積しておく必要がある。ロボット科学者の現状はまだ構想・試作段階であり、実用化にはもう少し時間がかかるものと思われる。

ロボット科学者が実現すると、人間の研究者の仕事はなくなるのだろうか。ロボット科学者は材料の組成、安定相、プロセス条件と物性との相関関係を示すだけであり、良い特性の材料が得られたときに、なぜ良いのかを論理的に答えることはできない。この答えを出すのはやはり研究者の仕事である。「なぜ」がわかれば、研究者がロボット科学者に出す次の一手は、より高い目標の提示になるであろう。

（参考）

- ・ 科学技術未来戦略ワークショップ報告書「多様な安定相からの高機能材料の創製」（CRDS-FY2018-WR-11、pp.5-14）
<https://www.jst.go.jp/crds/report/report05/CRDS-FY2018-WR-11.html>
- ・ 有機材料合成でこの構想に基づいた装置の開発（University of Glasgow）：
<https://www.nature.com/articles/s41586-018-0307-8>（2019年5月7日時点）
- ・ ロボットケミストの開発計画（University of British Columbia、2018年11月）：
<https://science.ubc.ca/news/ubc-robo-chemist-could-speed-discovery-clean-energy-materials>（2019年4月3日時点）

2. 研究開発を実施する意義

2-1. 現状認識および問題点

地球温暖化抑制のための温室効果ガス（CO₂）の削減、環境負荷の低減、自動車の自動運転やIoTなど高度な情報化社会を目指す Society 5.0 の実現など、様々な社会的課題の解決に向けて、技術を根本から変革し大幅な性能向上や高機能化などを実現できる材料・デバイスへの要求はますます高まってきている。例えば、電池、半導体素子、磁石、軽量高強度素材、熱電材料、高温耐熱材料などに対しては、高機能化が求められることはもちろん、大容量／小型／軽量、高速動作／高耐圧、高保磁力／高飽和磁化／高耐熱性、高強度／高靱性、高電気伝導／低熱伝導、高耐熱性／高耐久性といった複数の機能や相反する機能の同時実現も求められるようになっている。

表 2-1 高機能材料開発に対する要求の例

機能材料	機能に対する要求	従来材料例	現在開発中の材料例	応用分野
蓄電池固体電解質	高速 Li イオン伝導と広い電位窓の共存	LiPS	LiSnSiPS	エネルギー、モビリティ
蓄電池正極材料	高 Li 吸蔵・放出特性と安全性の両立	LiCoO	LiMnNiCoO	エネルギー、モビリティ
太陽電池	高い変換効率と長期信頼性の共存	Si、GaAs	CIGS、CH ₃ NH ₃ PbI ₃ （ペロブスカイト）	エネルギー、環境
構造材料	軽量化と高強度の両立、高強度と強靱性の両立	ハイテン、Al 合金	CoCrFeMnNi（ハイエントロピー合金）	モビリティ、エネルギー
熱電変換材料	高電気伝導度と低熱伝導の両立	BiTe、PbTe	PbNaGeTe	デジタル、エネルギー
磁石材料	高保磁力と高飽和磁化の両立	NdFeB（Dy 添加）	NdLaCeFeB	モビリティ、エネルギー
ワイドバンドギャップ半導体	高耐圧と高速動作（高周波動作）の両立	SiC、GaN	α-Ga ₂ O ₃ （準安定相）	モビリティ、エネルギー
蛍光体	多様な発光波長と高輝度の共存	YAG	(Ca,Y)-α-SiAlON:Eu	環境、エネルギー
触媒	高い触媒機能と耐熱性、低コストの共存	Pt、Rh	PdRu、PdRuM	環境、モビリティ
水・ガス分離膜	高い物質選別性と高処理能力の両立	酢酸セルロース	ゼオライト、金属有機構造体（MOF）	環境、エネルギー
有機半導体	高移動度と塗布（大面積化）の両立	ペンタセン（低分子）	PBTTT（高分子）	デジタル

このような機能材料開発に対する高度な要求に対し、これまでそれぞれの応用分野で様々な試行錯誤が行われた結果、多くの高機能材料が発見され（表 2-1 にいくつかを例示）、材料開発が継続されてきたが、それぞれで限界に近づいている。もはや、それぞれの応用分野でこれまでに知られている単純な組成や熱力学的にも安定で作り易い構造の材料だけでは対応できなくなっており、未知の可能性を秘めているさらに複雑な組成や、従来手法では作製が困難なため未利用と

なっている多様な安定相の活用へ対象を広げていくことが必要になってきている。このような未踏かつ広大な材料探索空間においては、多種多様な安定相とそれに付随する特性・機能が存在すると思われ、材料の基礎的な研究対象としてだけでなく、応用上も非常に魅力的であり、新たな材料探索・創製に対するパラダイムシフトを起こすことにもなると考えられる。しかし、このような膨大な材料探索空間に対して闇雲に探索していくことは効率が悪く、何らかの指針に基づいて材料設計をすることが必要であるものの、考慮すべきパラメータが多く、それらの相互作用なども含めて全ての役割を明確にして制御することは非常に困難であるため、これまでほとんど手が付けられてこなかった。

一方、第一原理計算や量子モンテカルロ法などのシミュレーション技術、ビッグデータ解析、機械学習、ベイズ推定などのデータ科学を用いたデータ駆動型材料設計技術（マテリアルズ・インフォマティクス）が材料探索の効率性を飛躍的に向上させる手法として世界的にも注目を集め、最近急速に進展している。また、同時に多様な組成の材料を作製するコンビナトリアル手法の開発や、ロボットを用いたハイスループット実験室の構築など、新しい研究手法も発展してきている。このような新しい研究手法を活用することによって、広大な探索空間の中から目的の機能を有する特定の安定相の選択、さらには、その安定相を実用的にも安定な材料として実現するための作製プロセスの構築も可能になると考えられる。これまでは困難であったかもしれないが、この未踏領域に果敢に挑戦する時期になってきたと言える。

ただし、これに挑戦するためには、①各材料分野において蓄積された材料データの絶対量が少ないことに加え、材料分野を跨がるデータ共有が行われていない、②作製プロセスも材料ごとに個別最適化されており、他の材料への適用が進んでいない、という課題をクリアする必要がある。現状では、材料ごとに研究コミュニティが分断されており、また、材料設計、プロセス設計、観測・評価、データ科学といった分野間の連携も希薄である。これらの問題点を克服して、未踏の材料探索空間に果敢に挑戦していく体制を整え、それぞれの応用分野、技術レイヤーの知見を共有していくことで、様々な応用分野を横断する新たな材料設計指針および作製プロセス設計指針を構築していく必要がある。

2-2. 社会・経済的効果

本提案による未開拓の材料創製への展開と新たな材料創製指針の構築により、これまで以上に材料選択の幅が広がるとともに開発のスピードが向上し、様々な社会のニーズに対応した多様な新機能・高機能材料の早期創出と日本の産業競争力の強化が期待される。また、新たな材料が開発されることで、それを用いたデバイスやシステムの性能向上や使いやすさ、提供されるサービスの向上などを通して、持続可能な開発目標（SDGs）や Society 5.0、安全・安心な生活の実現など様々な社会のニーズに大きく貢献することが期待される。経済的な効果について定量的に予測することは簡単ではないが、材料の開発がボトルネックとなっている応用分野の例（(1) エネルギー分野、(2) モビリティ分野、(3) デジタル革新分野、(4) 環境負荷低減分野などの表 2-1 に示した例示）に関する、将来の産業規模予測を参考に検討する。

(1) エネルギー分野

低炭素社会の実現に向け、創エネルギー、畜エネルギー、省エネルギーを実現する高効率の革新デバイスの開発とこれに用いる新機能・機能材料の創出が望まれている。特に、創エネルギー

は新興国を中心に拡大するエネルギー需要に対し、低炭素の観点から化石燃料の効率的な利用と風力や太陽光などの再生可能エネルギーの利活用の拡大が強く求められている。火力発電の高効率化に向けては、1700℃級ガスタービンやアンモニアとの混焼などの開発が行われており、この高温に耐え高強度のタービンブレード用材料開発が活発に行われている。新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) によれば、その市場規模は今後 2040 年までに石炭火力で約 520 兆円、LNG 火力で約 270 兆円、累計で 790 兆円が見込まれている。年平均では約 30 兆円の規模であり、我が国ではこのうちのシェア 1 割(約 3 兆円)の次世代火力発電技術の市場の獲得を目指している。

また、「世界原子力産業現状報告 2018 年版 (WNISR2018)」によれば、世界の再生可能エネルギーとしては、2017 年に 157GW の電源が増設されており、前年の 143GW を上回り過去最高の伸びを記録している。この内 52GW が風力発電、97GW が太陽光発電によるものであり、太陽電池や風力発電機、およびパワーコンディショナ等の電力変換機器のさらなる高効率化と低コスト化が望まれており、このための新規材料開発が期待されている。(株)富士経済の「2018 年版 太陽電池関連技術・市場の現状と将来展望」によれば、太陽電池関連の世界市場規模は 2030 年に 4.9 兆円に達することが予測されている。

再生可能エネルギーのさらなる普及に向けて、太陽光や風力などの昼夜、季節による発電量の変動や電力需要の変動を効率的に管理運用するために、大型の蓄電デバイスや情報通信システムを含めたスマートグリッドの実用化が始まっており、電力系統連系システムの強化と、高効率・安全で小型・大容量の蓄電デバイス、超低損失の電力変換デバイスが強く求められている。これらの革新デバイスの市場規模は増大しており、電力貯蔵用大型二次電池は 2030 年に 1.3 兆円に達し、パワー半導体は 2030 年に 4.6 兆円、電力変換デバイスを用いた機器(自動車用含む)は 2030 年に 20 兆円に達すると予測されている。

(2) モビリティ分野

自動車をはじめとして、あらゆる輸送機器で排ガスや燃費等の環境規制の強化に伴い、パワートレイン(駆動系)の電動化、燃費向上と排ガス浄化への対応が求められている。特に、電動化に対しては従来のガソリンエンジン車と同等の航続距離の実現を目指した蓄電デバイスのエネルギー密度や出力密度の向上とともに安全性や低コスト化が強く求められている。また、エネルギー利用効率向上に向け、インバータなどの電力変換機器を主体とする駆動回路の効率向上や駆動モーターの効率向上とともに、車輦の軽量化に向けた取組みも活発に行われている。

車載用の蓄電デバイス(二次電池)としては、エネルギー密度の向上とともに安全性の大幅な向上や急速充電への対応が期待される全固体二次電池が今後主流になると予測されており、(株)富士経済の予測によると、2020 年代半ばから徐々に実用化が始まり、2030 年には 3300 億円、2035 年には 2.8 兆円へと市場規模は急拡大するとしている。また、電気自動車のエネルギー利用効率向上に向けた新たな半導体材料を活用した電力変換デバイスの開発が進められており、(株)矢野経済研究所によれば 2025 年には 25.4 億ドルの市場規模に成長すると予測している。モーターの効率向上に向けては、主な構成材料である磁性材料の損失低減や高性能化に向けた研究開発が活発に進められており、(株)矢野経済研究所によれば、電気自動車の本格普及により車載モーター市場は 2016 年の 30 億個から、2025 年には 44.7 億個と急拡大すると予測している。また、富士経済は、自動車、家電/住設機器、ドローンなどに用いられる小型モーター市場は 2025 年に約 3.9 兆円規模に拡大すると予測している。

車輛の軽量化によるエネルギー利用効率の向上に向けては、超高張力鋼板、アルミニウム合金、炭素繊維強化プラスチック（CFRP）などのさらなる高性能・軽量材料の開発と実用化に向けた取組みが活発に行われている。また、これらの材料を活用するための加工技術や異種材料接合技術の開発も積極的に行われており、NEDO では 2030 年に 373.8 万トンの CO₂ 削減、および 1.2 兆円規模の市場になると見込んでいる。

(3) デジタル革新分野

IoT、ビッグデータ、AI などのデジタル革新のためには、あらゆる生産現場や日常生活からの大量のデータを取り出すためのセンサーとセンサーネットワーク、これらの大量のデータを蓄えるサーバーシステム、さらには大量のデータから有用な分析情報を人々に提供することができる社会基盤の構築が求められている。IDC Japan によれば、国内 IoT 市場はソフトウェアやサービスも含め 2016 年には 5 兆円であり、2021 年に向けて年平均 17% で成長し、2021 年には 11 兆円に達すると見込んでいる。その時の通信ネットワーク、センサーモジュール、サーバー等のハードウェアの構成比は 31% であり、その市場規模は 3.4 兆円に達すると予測している。

センサーについては、「2019 センサーデバイス／ビッグデータ・IoT 市場調査総覧(上巻)」((株)富士キメラ総研 2019 年 01 月発刊)によると、新規の材料や計測手法の研究開発により急速に高精度・高機能化と応用分野の拡大が進み、IoT 用途だけでなく車載用も含めると、世界市場は 2022 年には 7.7 兆円、971 億ユニットに達すると予測している。また、センサー設置場所における照明や太陽光、振動、熱などのエネルギーを活用して発電するエネルギーハーベスティング(環境発電)デバイスや小型蓄電デバイスの研究開発も活発に行われ、米 BCC Research 社「市場調査レポート(リサーチステーション合同会社 2018 年 6 月刊)によれば、エネルギーハーベスティングデバイスの世界市場は、2018 年の 17 億ドルから、2023 年には 44 億ドルへと、平均年成長率 20.2% で急拡大すると推定している。

(4) 環境負荷低減分野

環境負荷低減分野は、エネルギー、環境負荷物質低減、資源リサイクル等広範な分野に亘っている。エネルギーについては前項(1)に記載したとおりエネルギー効率の高いデバイスが強く求められている。これに加え、化石燃料資源などをエネルギー形態に効率的に変換する触媒である石油精製関連触媒や石油化学品製造プロセス用触媒、次世代エネルギー技術で利用される水素貯蔵用・製造用触媒、アンモニア合成用触媒などの高性能化と低コスト化が求められている。一方、新興国の自動車を中心とするモビリティの普及に伴い化石燃料を用いる輸送機器の排ガス浄化性能の向上や浄化装置の低コスト化が強く求められている。このために高価な貴金属を使わない高性能な排ガス浄化触媒の開発が活発に進められている。また、温和な条件で目的とする有用な化学物質が得られるといったエネルギー使用量が少なく廃棄物が発生しない反応効率の高い製造プロセスの実用化が望まれており、高性能な触媒の開発が強く求められている。

これら環境やエネルギー関連の触媒の世界市場は、「環境・エネルギー触媒関連市場の現状と将来展望 2018」((株)富士経済、2018 年 10 月刊行)によれば、2030 年の市場規模は環境触媒が 2.2 兆円(2017 年比 39.6% 増)、エネルギー触媒が 2.7 兆円(2017 年比 45.8% 増)と予測している。

以上のように例として示した4つの応用分野においては、今後も市場が拡大し4分野全体では数十兆円の規模になることが予想されている。この中で、新機能材料開発の寄与がどの程度あるか見積もることは難しいが、仮にデバイス・装置の市場規模に対する材料の寄与が10%程度とすると、上記4分野の市場の材料寄与分の市場（数兆円規模）を大きく変えるポテンシャルがあると考えられ、大きな経済的効果がある。

また、これらの分野では正に変革期を迎えており、ここでの新材料開発は社会的にも大きな影響を与えると考えられる。エネルギー分野では、化石燃料から再生可能エネルギー導入への大転換が急速に進んでいくと考えられる。新材料開発によってもたらされる太陽電池の発電効率の向上や、蓄電池の大容量化・低価格化、パワー半導体の低損失化・高周波動作・低価格化などにより、電力需給の問題も緩和され、大規模発電所だけでなく、家庭を含めた小規模な発電が大幅に増え、次世代送電網のスマートグリッドが大きく進展すると予想される。

モビリティ分野も化石燃料から電気駆動への転換とともに、単なる移動媒体からサービス媒体へと、100年に一度と言われる変革が始まっている。希少元素を使わない磁石の高性能化によるモーターの高出力・小型化、蓄電池の大容量化・高出力化・小型化、パワー半導体の低損失化・小型化などにより、電気駆動の自動車・バスやパーソナルモビリティなどが急速に広がっていき、自動運転技術の向上などとともに、高齢者・障害者も含めた個々人の要望に沿って自由に移動できる快適なモビリティのサービス・システムが構築されることが考えられる。

IoT、ビッグデータ、AIなどのデジタル革新分野では、日本はSociety 5.0のコンセプトを提唱し単に経済的効果だけでなく、デジタル革新と人々の創造力の融合によって社会の課題を解決し、価値を創造する創造社会の実現を目指しており、新材料開発力の向上によりこのような社会の実現に向けた活動が加速されることが考えられる。これからのIoT/AI時代には、工場、社会インフラ（道路、トンネル、橋梁など）だけでなく、エアポート、駅、ショッピングセンターなどの人が集う場所や家庭の中にも、様々な情報の収集を行う多様なセンサー端末を配置する必要がある。新材料開発による高感度・低消費電力のセンサー、熱電発電などのエネルギーハーベスティングデバイス、超小型蓄電池などが実用化されることで、各種のセンサー端末を容易に安く作製することが可能になり、本格的なIoT/AI時代が到来しSociety 5.0が実現される。

環境負荷低減分野では、地球温暖化・気候変動抑制、大気汚染・海洋汚染防止などが喫緊の課題となっている。新材料開発による各種触媒や分離膜などの高効率化・長寿命化・低価格化などが実現されることで、短期的には効果が見えにくいこともあるが、長期的には安全な飲み水の確保、PM2.5などの汚染物質の削減、異常気象の低減などに繋がると考えられる。また、この分野に限らず他の分野においても、新材料開発における目的の機能を発現する安定相の探索・選択の幅が大きく広がることで、原料の調達リスクや環境汚染のリスクが減少すると考えられる。例えば、強力な磁石であるネオジム磁石に添加されているジスプロシウム（Dy）などの希少金属は中国など限られた場所からしか採掘されず、またその取り出しに伴う河川などへの環境汚染が問題となっているが、Dyを使わず高クラーク数の元素のみで強力な磁石材料の創製が実用化されれば、原料調達／環境汚染のリスクが大きく減少する。他の例としては、圧電素子に使われるPZTや、熱電素子に使われるPbTeなどには有毒物質の鉛（Pb）が含まれているが、鉛を含まず圧電特性、熱電特性の優れた安定相を持つ材料が創製できれば、鉛の利用や拡散を防止することが可能になる。このように、多様な安定相の利用による新材料開発が進むことで、世界の人々が安心して暮らせる社会の構築が促進されることが考えられる。

2-3. 科学技術上の効果

本提言の研究開発を実施することにより、これまでよりも複雑な組成や構造を持つ材料の研究や利用に対する関心が高まるとともに、相反物性（例えば、構造材料における軽量化と高強度、熱電材料における高導電性と低熱伝導性、磁石材料における高飽和磁化と高保磁力）を内包する新たな機能材料を創製するための新たな学理を確立することができる。また、これにより、多様な安定相の中から高機能なものを効率的に探索し、実際に目的の安定相を得る作製プロセスを容易に設計することが可能になる。以下、これらについて説明する。

これまでの材料の設計は、各応用領域でのより良い性能・機能の発現を目指し、比較的少数の構成元素からなり、プロセス上も作りやすい最安定相を主な対象としてきた。しかし、近年では複数機能の共存や相反する機能の両立なども求められるようになっており、比較的単純な組成・構造を対象とする新材料探索はもはや限界にきている。また、資源や環境の問題から、材料開発にあたっては、低クラーク数元素の不使用、材料作製プロセスの低温化による省エネルギー、資源循環の促進など地球持続性への対応などが求められるようになっている。本提案は、このような材料開発に対する高度な要求に対応するために、構成元素の種類や数、作りやすさといった制約を取り払い、従来の材料探索範囲を大きく広げることを狙っている。例えば、多元素化を進めることでそれぞれの元素の持つ特徴・役割を活用したり、元素配置の自由度を飛躍的に高めたり、準安定相などを含む多数の安定相の利用を考えていく。また、作製プロセスにおける反応過程を「見える化」して現象を把握することで、反応経路を自在に制御し、これまで現れなかった未知の安定相を発現させることも行っていく。このような取り組みを進めていくことで、多くのデータの収集と分析・解析から、新たな安定相形成過程に及ぼす元素の役割、結合状態、エントロピー、プロセス制御手段などの効果を理解し、新たな知識として蓄積していくことや、材料設計の新たな指針の構築が可能になる。これらを通して材料創製の新たな学理の構築が進むと期待される。

最近のデータ科学と計算科学の進歩によるマテリアルズインフォマティクス (MI) の発展はめざましく、これまでに得られた材料の組成や構造と特性・機能のデータを活用した効率的な材料設計が可能になっている。一方で、データのない領域での材料候補を出すことは難しいことや、実際に作製可能かどうかわからないこと、特性が良くなる理由を明確には示せないこと、などの問題もある。このため、本提案の研究開発による未開拓の材料探索空間まで検討対象を大きく広げ、材料設計と作製プロセス設計を同時に考え、元素などの役割を明確にしていくことで、従来の MI よりもさらに進んで作製プロセスの設計にも活用する「ポスト MI」の構築につながっていくと考えられる。

このように大きく拡大された材料探索空間から多様な安定相を設計し作製プロセスを制御する指導原理が明確化してくると、実用的な新材料創製技術に結びついてくる。これにより、産業界の関心も高まるものと考えられ、産業界の応用上の課題や新たな材料機能への要求なども、アカデミアに伝えられることで、産学の連携が進むものと期待される。また、これらの技術蓄積の過程で、その場観測やオペランド計測に対する新たな計測技術や計測機器の開発、新たな作製プロセスやプロセス装置の開発が行われることで、さらにプロセス中の反応過程の理解が進むものと考えられる。

本提言に基づいて開発される材料は、様々な用途に展開される可能性を秘めているため、特定の領域に限定されない横串的な領域を設定することにより、戦略的に分野融合や新たな用途を誘

発していくことが可能と考えられる。その結果、材料の理論計算・シミュレーション、作製プロセス、プロセス計測、構造評価、特性評価、データ科学などの幅広い分野の研究者・技術者からなる新たなコミュニティの形成が期待される。

また、このようなコミュニティによる新たな教育プログラムを構築することにより、ダイナミックな安定相形成過程や作製プロセスまでも考慮した材料設計ができる人材、データ科学やハイスループット実験を使いこなし、分野横断的に安定相と機能性との関係を素早く理解し、新たな機能材料創出の指針を生み出せる人材の育成が期待される。

3. 具体的な研究開発課題

ここでは新たな機能、複数の機能の共存、相反する機能の両立など、今後要求が高まる高度な機能を実現する材料創製における重要な研究開発課題について述べる。具体的には、多元素化、準安定相／不安定相の利用、ハイエントロピー化などによる未開拓の材料への検討範囲の拡大、作製プロセス中の反応過程の可視化と反応経路の動的制御、プロセス制御手段の活用による目的安定相の実現である。重要な視点としては、応用分野の既知の材料創製範囲から未開拓の領域に果敢に挑戦し、材料設計とプロセス設計を一体的に考え、反応過程やそこでの現象を詳細に把握して反応経路をダイナミックに制御し、目的の安定相を実現させることである。

3-1. 材料探索範囲の拡大

(1) 多様な安定相の利用

これからの材料に求められる高度な機能を実現するためには、従来の研究開発の範囲から抜け出す必要がある。そのためには、図 3-1 に示すようにこれまでの応用分野の常識にとらわれず、多元素化による従来とは大きく異なる組成や構造、これまで通常的环境下では現れていない、あるいは作製が困難で利用してこなかった安定相、熱力学的に不安定な相などに対して新たなプロセス制御手法の開発などに挑戦していくことが重要である。

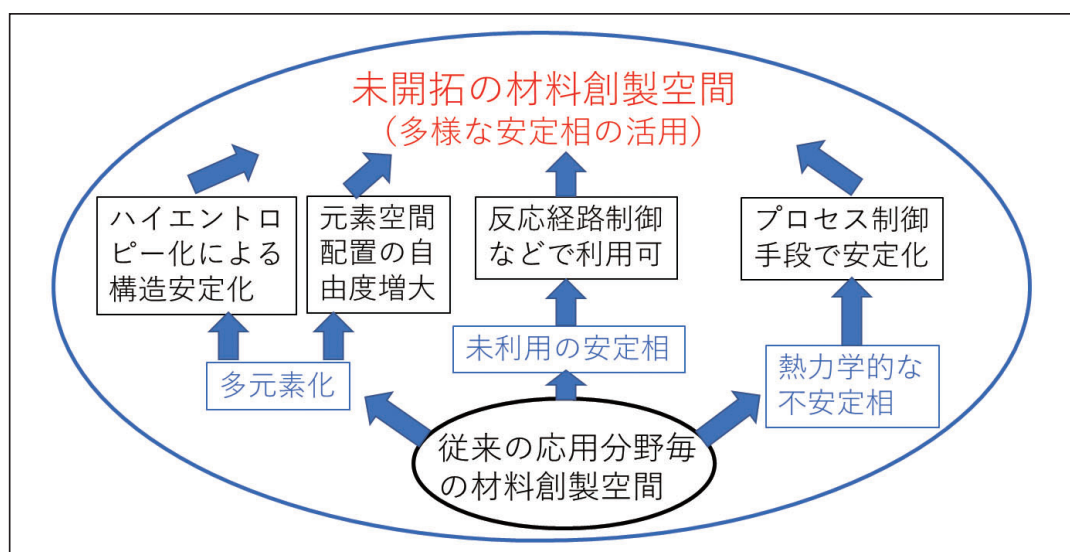


図 3-1 未開拓の材料創製空間への展開

多元素化を進めることで、それぞれの元素の有する物理・化学的な性質が材料の特性・機能に大きな影響を与え、特性変化や多様な機能の発現が期待される。また、元素の空間配置の自由度が増大することで、元素間の結合状態（配位数）の変化、ユニットセルの拡大などの新たな構造の発現などが期待でき、多くの準安定相が現れると考えられる。多元素化の一つの方法であるが、各種の元素を等量混ぜることにより配置のエントロピーを増大させ、非対称な原子間結合における大きな局所的な歪の発生や、格子ポテンシャルエネルギーの揺らぎの影響で原子の移動が妨げられたりすることを通して、材料の特性が大きく変化することも期待される。さらに、これまで

はやや不安定と考えられていた準安定相や不安定相に対して、後から述べる反応経路の制御やプロセス制御手段による安定化の手法を構築することで、実用レベルで使える材料とすることも考えられる。このような各種の方法を提案し、材料探索範囲を飛躍的に広げることで、その中から所望の特性・機能を持つものを探し出していくような研究開発を行うことが望まれる。

(2) 構成元素、結合状態などの役割の明確化

材料の基本的な特性・機能に大きな影響を与える、特定の安定相における構成元素、結合状態、多元素化、微量な添加元素などの役割の明確化が必要である。膨大な数の安定相の中から、目的の特性・機能を有する安定相を選択し、実際に材料として作製することが求められているが、これを効率的に行おうとするのは容易ではない。一つのやり方としては、目的の特性・機能に近い既知の材料を基に、その周辺の材料系を探すやり方がある。ここでは、第一原理計算やデータ科学によるマテリアルズ・インフォマティクスを用いて候補材料を選択し、それを作製できるプロセス技術を開発し、実際に作製した材料の特性・機能を評価し、そこからさらに良いと考えられる候補材料を選択して、この作業を繰り返す。このような作業はそれぞれの応用領域で目的ごとに行われているが、これらの膨大な検討結果や実験結果を応用分野に跨がる共通の知識として共有することが重要である。特に、材料の基本的な特性や機能に対する構成元素、それらの結合状態、多元素化、微量な添加元素などの効果や役割を明確にすることが重要である。これにより、応用分野によらず候補となる材料の構成元素や組成などの絞り込みが容易になると考えられる。

このような構成元素などの役割を早期に明確にするには、最近の進展が著しいコンビナトリアル手法などのハイスループット実験や、AI・機械学習を用いたビッグデータ解析、ベイズ最適化などのデータ科学の利用が望まれる。例えば、構成元素を決めたときに、あらゆる組合せの組成の材料を同時に作製し、その材料の様々な物理的特性を網羅的に測定・評価し、得られたデータをデータベースに蓄積すると同時に、AIによるビッグデータ解析を用いて、組成と各物理特性との相関、各物理特性間の相関を求め、そこから各元素の役割などを明らかにしていくことが考えられる。

(3) 作製プロセス中における添加元素、エントロピー（ハイエントロピー効果）、歪みなどの反応経路に関する役割の明確化

構成元素や組成が同じであっても、作製プロセス中の反応過程によって、できてくる安定相およびその特性・機能は異なってくる。このため、作製プロセス中での安定相の変化に対する各要素の役割を明確にしておくことは重要である。原料、前駆体、微量な添加元素、多元素化に伴うエントロピー増大の効果、基板による格子整合・歪みの効果などの反応過程におよぼす影響や役割を明確にしておくことが必要である。ここでも、ハイスループット実験やデータ科学の利用は重要と考えられる。例えば、作製プロセス中の温度変化、圧力変化、基板の種類、添加元素の有無や種類、などを変えた実験（プロセス条件）と、得られた安定相との相関のデータを蓄積し、それを分析することで、作製プロセスにおけるこれらの影響・役割を明確にしていくことが考えられる。

(4) 実験・評価・分析データのデータベース化

上記の(2)、(3)で得られた各種のデータや分析・解析結果は、応用分野を横断して材料創製の研究開発領域全体で知識が活用できるように、データベース化して共用化することが必要である。

そのためには、材料設計と作製プロセスにかかわるデータに関しては、あらかじめ掲載するデータの項目およびデータベースの形式（フォーマット）を統一しておくことが重要である。

(5) 新たな安定相の設計・創製に関わる主要因子の抽出と学理としての体系化

材料の特性・機能や作製プロセスに及ぼす構成元素などの役割の明確化や実験データのデータベース化は新機能材料創製に向けて実用上も重要である。研究者が実験データを取得する場合は、それまでの経験に基づいて仮説を立てて実験を行い、予測した通りの結果が得られれば、仮説が正しかったことになる。一方、構成元素が増えて多次元の事柄を考えなければならなくなると、研究者の経験に基づいて仮説を作ることが困難になり、AI などデータ科学に頼らざるをえなくなるが、AI によって導き出される方策は、結果は良いがなぜそのような結論になるのか人間には理解できない場合も多くある。このため、人間が特性・機能と元素や結合状態などとの関係を容易に理解でき知識として活用して、材料設計・プロセス設計のシミュレーションに使える単純化したモデルが構築できるように、特性・機能あるいは作製プロセスの反応過程に強い影響を与えている主要因子を抽出して、学理として知識の体系化を図ることは非常に重要である。これにより、人間が納得感・安心感を持って得られた結果を利用でき、さらに飛躍した発想もできるようになると考えられる。

(6) 応用分野を横断し、新たな安定相を探索・設計する指針の構築

構成元素や結合状態、エントロピー、歪みなどの役割・効果を明確化することや、得られた知見を学理として体系化することを通して、新たな安定相を探索・設計する指針、あるいは新機能材料開発の新たなコンセプトを、応用分野横断で構築することが重要である。このような取り組みにおいては、例えば、電気陰性度のような代表的な物理的パラメータで結合状態を推定し材料特性を類推するように、できるだけ簡単な描像で理解できるようにすることが望まれる。

3-2. 作製プロセス中の反応過程の可視化と反応経路の動的制御

(1) 作製プロセス中のその場観測による反応過程の可視化

目的の特性・機能を有する安定相を作製するには、どのようなプロセスを経るか、あるいはどのような反応経路を選択するかが重要になる。安定相の元素組成や配列と安定性との関係を示す概念図を図 3-2 に示す。この図では、横軸の真ん中辺り (X1) に、エネルギーが最小となる最安定相が存在するとしており、その左右には複数の安定相 (準安定相) があると仮定している。今、目的の機能を持つ安定相が最安定相の右隣 (X2) にあるとし、実線の右上の点から反応を進めていくと仮定すると、すぐに深いポテンシャル障壁を持つ右端の安定相 (X3) に陥ることになり、その左側の目的の安定相に移ることは難しく、目的の安定相を得ることはできない。このため、点線のように反応の出発点を変えることで、一つの反応過程を経るのではなく、ダイナミックに複数の反応過程を経るなどして、別の反応ルートを経る必要がある。

作製プロセスにおいてどのような反応経路をたどっているかを実時間で観測するのは現状では難しいが、反応生成物、雰囲気、構造変化などをその場で観測・計測することにより、このような状況をある程度推定することができ、これにより適切な反応経路を見つけることが可能になると考えられる。

このような反応過程の詳細な設計をしていくためには、プロセス中で実際に起こっていることを観測・測定するオペランド計測が重要であり、反応系全体の雰囲気および反応生成物をモニタリングすることや、構造の変化を観測するなどの装置や技術の開発が重要になる。このようなオペランド計測が可能になれば、反応過程をある程度可視化することができ、反応過程、反応経路の理解を深めることができる。

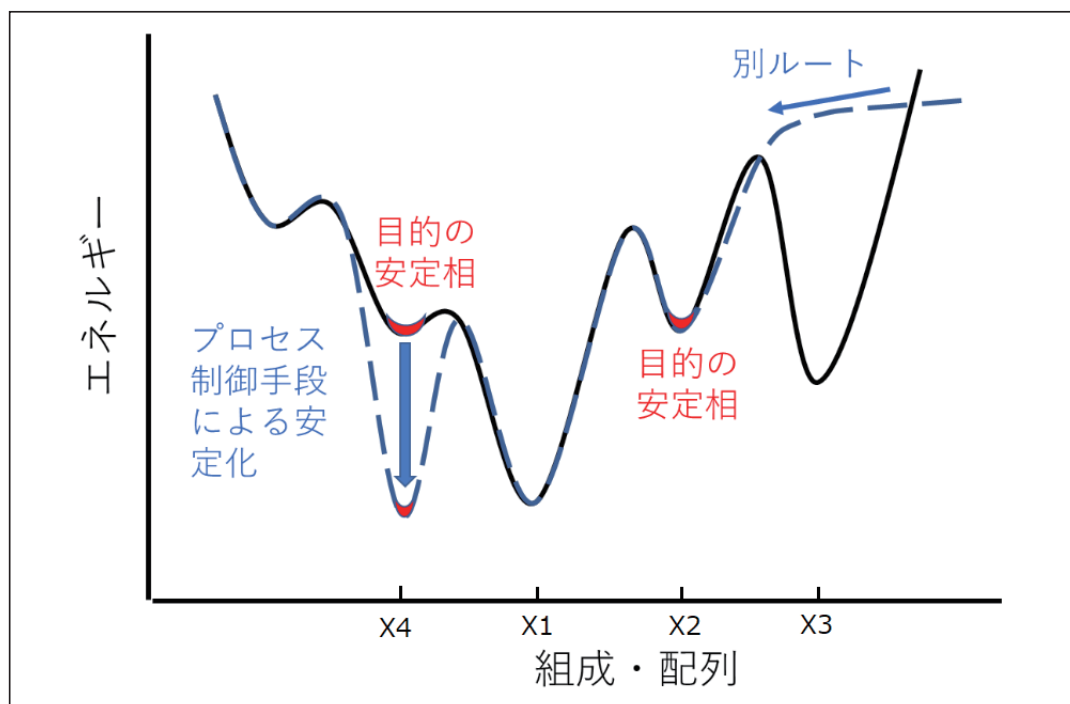


図 3-2 安定相の元素組成・配列と安定性との関係を示す概念図

(2) 可視化できない現象の理論などによる補完とモデル化およびプロセスシミュレーション手法の開発

反応過程における全ての現象をガス分析や構造解析などのオペランド計測で可視化することは難しいため、欠ける部分については反応の理論計算や、これまでに蓄積してあるプロセス関連のデータから反応の特徴を抽出することなどが必要である。これらにより、実際に観測できる反応過程を補完し反応過程の全体像を把握し、反応過程全体をモデル化することが重要である。

反応過程全体をモデル化することにより、作製プロセス全体をシミュレーションできるツールの開発が可能になる。このようなプロセスシミュレーターを開発することにより、実際の実験結果との比較が可能になり、実験結果との差違を検討することによりさらに高精度な反応過程のモデル構築およびシミュレーターの開発が進むことが期待される。

(3) プロセス中のダイナミックな反応過程と安定相変化の科学的理解

オペランド計測による反応過程の雰囲気、反応生成物、構造変化の観測や、理論計算、プロセスシミュレーション手法の構築などを基に、様々な安定相の形成における反応経路や反応過程のダイナミックな変化を科学的に詳細に理解し、これらを反応過程と安定相変化を統一的に扱う新たな学理として整理していくことが重要である。

(4) 動的な反応過程の理解に基づく反応経路の制御手法の開発

以上の反応過程の詳細な理解に基づき、目的の安定相を得るための反応経路の精密な制御に関する手法の開発を行う必要がある。特に、多様な安定相が同レベルの自由エネルギーを持つ場合や、反応過程の途中で他の安定相が現れ易い場合、多段階の安定相を経る必要がある場合などにおける制御手法の構築には注意が必要である。例えば、同一レベルのエネルギーを持つ他の安定相に落ち込まず、目的の安定相にたどり着くためには、最適な反応経路を見つけること（設計すること）や、実際の反応中の状況をリアルタイムにモニタリングし精密にフィードバックをかけるような制御が重要になる。また、反応過程の途中で他の安定相が現れるような場合には、その安定相から目的とする次の安定相に移るためのエネルギーバリアを超えられるように、触媒（正触媒）を使うなど新たな反応過程を追加することや、原料を変えたり、前駆体の形成を大きく変えたりして、全く別の反応ルートを選択することも必要である。

3-3. プロセス制御手段の利用による目的安定相の実現

安定相の中には、特性・機能が魅力的であっても、他の安定相とのエネルギーバリアが低く、使用環境では不安定になるものも存在する。例えば、図 3-1 の最安定相の左側にある安定相（X4）のような場合には、最安定相との間のエネルギーバリアが低くなっている。このような安定相に対しては、反応経路の動的制御だけでは、たとえ材料ができたとしても実際に使うことができない。このため、目的の安定相をさらに安定化させる（エネルギーバリアを高くする）手法の構築も必要である。

このような特定の安定相の安定化を促進する方法としては、特定の結晶面を持つ結晶基板により、エピタキシャル成長する原子の配列を強制的に揃えていくものや、材料の特性や機能にはほとんど影響を与えない微量の添加物を加えて安定化させるもの、高温・高圧の状態から急激に温度を下げたり圧力を下げたりしてクエンチ（quench）させるものなどが考えられる。前者の2つの場合には、基板が存在することや特定の元素が存在することで、特定の安定相が誘導される。後者の場合には、材料の内部に歪みや電荷などの偏りを存在させることで、安定化が図られる。また、特定の安定相を出現しやすくするとともにその安定化にも効果を持つような前駆体（Precursor）や触媒の利用も有効と考えられる。このようなプロセス制御手段を活用することにより構造の安定化を図ることが可能と考えられるが、このプロセス制御手段の効果を定量的に評価し説明できるようにするとともに、安定化促進のための学理として体系化していく必要がある。

さらに、これらの安定化促進のための効率的な手法を開発することが重要である。プロセス制御手段として用いる基板、添加物、圧力、温度、前駆体、触媒などの安定化に及ぼす効果や寄与度を定量的に評価して、これらのシミュレーションツールを開発することで、多様な安定相の安定化技術として確立していく必要がある。

4. 研究開発の推進方法および時間軸

研究開発を効率的に進めるためには、材料設計（理論、シミュレーション含む）、プロセス設計、計測、データ科学に関わる研究者が相互理解をして一体的に取り組むことが重要になる。ここでは、そのための推進方法および大まかな時間軸について提案する。

4-1. 材料設計、プロセス設計、計測、データ科学に跨がる統合的研究推進

新たな機能や複数の機能、相反する機能の共存などを実現する新たな材料の創製に関わる材料設計・プロセス設計の指針を得るためには、材料設計から作製プロセス設計（反応経路設計）、作製プロセス、オペランド計測、特性評価、データ科学などの技術レイヤーに跨がる統合的な研究開発を行う必要がある。特に、応用分野を横串的に見ることで、特定の応用分野では探索範囲になかった材料系や作製プロセスおよびその制御手法などに対する幅広い検討を行い、新たな材料設計・プロセス設計の指針を得ることが重要である。ここでは、材料の機能に対する元素や結合状態の役割などの共通的な知見を蓄積していくことが重要になり、組成や結晶構造などがある程度類似の材料系をひとまとめにして研究チームを構成することが適当と考えられる。これは例えば3次元の物質と2次元の物質を一緒にして扱っても、安定相の特徴が大きく異なるため、共通の指針を得ることが難しいと考えられるためである。

研究チームにおいては、新たな指針構築を強く意識して全体をまとめていくリーダーの下で研究を推進することが望まれる。このような応用分野および技術レイヤーを横断するような研究では、適任となるリーダーを探すのは容易ではないが、組成・構造と機能との関係を深く考察できる理論の研究者や、材料設計とプロセス設計、あるいは評価とデータ科学など複数の技術レイヤーに渡る研究開発の経験があり、新たな指針の構築や学理の構築に強い指導力を発揮できる人が望まれる。

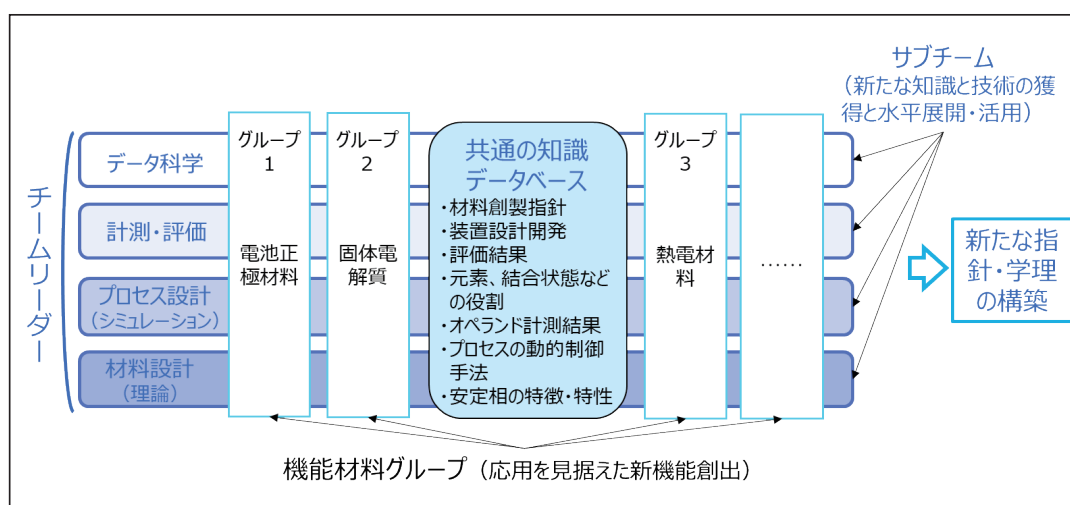


図 4-1 研究開発の推進方法の例

図 4-1 に研究開発の推進方法の一例として、このチームリーダーを中心とするチーム編成について示す。ここでは、縦と横に組織化された形で研究開発を進めていくことを考えている。材料

設計（理論）、プロセス設計（シミュレーション）、計測・評価、データ科学のそれぞれの技術レイヤー毎にサブチームを構成してサブリーダーを中心に未開拓の材料探索や多様な安定相の利用などに関する新たな知見と技術の獲得を目指す研究開発を行い、様々な応用分野での活用に向けた技術の水平展開を行う。また、各技術レイヤーに責任を持つサブチームを貫くような形で、特定の機能材料の開発を目指すグループが応用分野毎に存在し、各サブチームとの交流・連携を通じて、材料開発のための新たな手法を導入し、材料開発の加速を図る。チームリーダーは各サブチームや各グループの研究の進捗を把握し、サブチームやグループ間での情報共有を促進し、必要に応じてサブチーム間の密な連携や共同研究を提案して、全体の研究を推進する。

機能創出を目指す各グループにおいては、応用領域や実現したい機能が具体的に決まっているため、機能設計・材料設計の方向性が明確であり、各種データの収集や組成・構造と機能との関係や材料の作りやすさや安定性などの知見の獲得が迅速に進むと考えられる。これにより元素や結合状態などの機能に対する役割や作製プロセスにおける効果を検討する上でのデータや知見が蓄積される。

各技術レイヤーのサブチームにおいては、それぞれのサブチームに独自の研究開発を行うとともに、グループで得られたデータや知見を利用した研究を行う。例えば、材料設計（理論）のサブチームにおいては、未開拓の材料の組成・構造の安定性や現れる機能に対する理論的な検討を行うとともに、グループから出てきた組成・構造と性能・機能の評価結果を理論の視点から分析することが考えられる。また、プロセス設計（シミュレーション）、のサブチームでは、反応経路の制御に関わる理論的な検討やプロセスシミュレーション技術の研究開発を進めるとともに、各グループの作製プロセスと得られる組成・構造の安定性との関係を分析して共通あるいは新規の知見を得ることが考えられる。計測・評価では新たなオペランド計測や材料の特性評価の手法や装置の研究開発を行うとともに、グループの実験におけるプロセス上で不明な反応や知りたいパラメータの要求から計測・評価研究の新たな課題を見つけることが考えられる。データ科学においては、様々な安定相利用のマテリアルインフォマティクスやプロセス・インフォマティクスの手法を研究するとともに、全てのグループで得られた実験結果のデータを用いて、各グループにとっての材料の組成・構造の探索範囲を大幅に広げる指針の提示が考えられる。

これらのグループ活動やサブチームの活動で得られた実験データやそのデータを解析した結果、さらに各元素や結合状態の役割、プロセス中の反応経路の知見や安定相の精密制御方法などは、チームリーダーおよび技術レイヤーのサブリーダーが中心になって共通の知識として全体に展開するとともに、より一般化して理解できる形にし、新たな設計指針や学理の構築に活かすことが望まれる。具体的には、共通の知識データベース（図4-1の中央部分）を構築するとともに、チームリーダー、サブリーダー、グループリーダーによるチームの全体会議の中で重要な情報を共有して議論することで共通的な知見あるいはより一般的な解釈に繋げていくことが期待される。また、これらの情報や議論内容をサブチームおよびグループのメンバーに展開して、研究開発活動にフィードバックしていくことも期待される。このようなチームリーダーの強力なマネジメントの下で明確な目的を持ったサブチームとグループによる縦横の研究活動を密に連携して行うことにより、未開拓の機能材料創製への新たな設計指針や学理の構築が進むと考えられる。

上記のようなチームリーダーを中心とする応用分野を越えた統合的な研究は、関係する研究機関に跨がるネットワーク的な体制でも行うことは可能であるが、計測機器やプロセス装置（結晶成長装置、合成装置、成膜装置など）などの装置開発や、多様な分野に跨がる人材の育成などを

考慮すると、効率的な研究開発の観点では、研究拠点の構築が望まれる。

研究拠点においては、材料設計関係の理論・シミュレーション、マテリアルズ・インフォマティクス、作製プロセス、その場計測、プロセスシミュレーション、プロセス・インフォマティクス、材料物性評価関係のオペランド計測、などの研究者・技術者が集まり、密に議論し協力しながら研究を進める形になる。また、アカデミアだけでなく、応用分野の様々な課題を知る企業の研究者・技術者も参加することが期待される。一般的にはプロセス装置は研究者が保有して利用を特定の材料系に限定して利用している場合が多く、わざわざ拠点に行き共用の装置を使って研究するには、設備や人的交流において魅力ある拠点にする必要がある。例えば、プロセス装置には各種の計測・分析機器が接続されて、各種のプロセスデータ取得やコンピュータによる解析が容易にできるシステムが構築されていれば、利用が促進されるであろう。また、作製した材料はすぐに各種の物性・特性評価ができ、他の研究者の様々なデータを見ることができ、計測、理論、データ科学の研究者と常に議論できる機会と場所が確保されていれば、より魅力的である。

このような拠点の一つの特徴は、独自のその場観測装置やオペランド計測機器をプロセスの研究者とともに作製し拠点内で共有化できる点である。これにより、他では容易にまねできない独自の計測技術が構築できる。また、プロセス装置についても、反応過程の精密制御や安定相の動的制御に関する独自のアイデアを盛り込んだものや、開発したその場観測装置を組み込んだものが構築できる。プロセス装置については、扱う材料によってはコンタミネーションの観点から共用に適さない場合もあるが、装置設計のコンセプトを共有することで、既存装置の改良も容易になると考えられる。

拠点における各種計測機器やプロセス装置の共用利用と、統一的なデータフォーマットでのデータを蓄積していくことにより、失敗したときのデータなども含め他では得られない独自の実験データベースを構築することができる。また、データ科学により様々なデータの特徴や関連性を調べることで、新たな知見を得ることができ、それを体系化していくことも可能になる。さらに、応用分野を越えた材料・プロセス設計手法を構築することができ、拠点全体で共用化できる。

このような拠点の中では、異分野の研究者や、アカデミアと産業界との交流も活発になり、他の分野に興味を持つ研究者も増加し、いくつかの分野に跨がる研究者や、装置開発やプロセスの実用化に興味を持つ研究者、これまでの専門分野の発想を超えた考えを持つ研究者も出てくると期待される。そのため、研究者の評価において、これまでのように論文を中心にした制度だけでなく、論文になりにくいプロセス開発や装置開発、応用分野へのインパクト、企業との共同研究なども加味した新たな評価制度を構築することも求められる。

4-2. 時間軸

上記のような研究開発の推進を一気に行うのは容易ではなく、理論・シミュレーション、材料設計、プロセス、計測、データ科学など異分野の研究者・技術者が材料探索を未開拓の領域まで広げていくことに果敢に挑戦するという共通の目的意識を持った上で取り組む必要がある。このため、以下のように、新たなコミュニティの形成・活性化とプロジェクトによる支援の時間軸を考慮した推進が重要になる。

(1) 新たなコミュニティの形成と活性化

材料設計と作製プロセスを一体的に考えて未開拓の領域での研究開発を推進するに当たっては、理論・シミュレーション、材料設計、プロセス、計測、データ科学に跨る新たなコミュニティ

を形成していく必要がある。関連する学会としては、応用物理学会、日本化学会、結晶成長学会、金属学会、セラミック学会、情報処理学会、などが考えられるが、これらの学会に跨がる合同のシンポジウムを開催し、新たな研究領域を創設するなどの取り組みが必要である。これには、いくつかの学会の数人の主要メンバーを中心に、1年～5年程度の期間において集中的に新たなコミュニティ形成活動が続けることが必要であろう。

(2) プロジェクト化による支援

研究拠点の構築に関しては、新機能材料の研究開発を精力的に行っている国の研究機関または大学の研究センターなどを中心にすることが考えられる。ここでは、各種のプロセス装置、その場観察装置、材料物性評価装置、データベース、データ分析・解析システムなどを充実させ、産学官の各種プロジェクトで活用することが望ましい。また、研究拠点を1ヶ所に限る必要はなく、特徴ある作製プロセス技術を持つ研究機関を複数指定して密に連携させていくことも可能である。既存の設備・施設の有効活用や連携という視点も重要であり、文科省のナノテクノロジー・プラットフォームの分子・物質合成プラットフォームや、2019年度から始まるマテリアライズ・プロジェクトなどとの連携も考えていくことが期待される。研究拠点の魅力を最大化させるためには、長期的に装置が使えてデータベースを充実させることが重要であり、10年以上の長期の継続が望まれる。このような研究拠点の形成に関しては、早急に議論を進めることが必要である。

未開拓の材料創製への取り組みに関する研究開発課題には、特定の安定相の形成に関わる構成元素や結合状態などの役割、作製プロセス中の添加元素、エントロピーなどの効果を明確にすることや、反応過程を詳細に理解することなど、新たな学理の構築が求められている。また、安定相の設計手法の構築、反応経路の制御、安定化手法など、応用分野を横断し産業上も重要な技術開発も求められる。このため、アカデミアだけでなく産業界も加わり、先に述べた材料設計、プロセス設計、計測、データ科学に跨がる統合的な研究開発を国による研究開発プロジェクトとして推進することが望まれる。

このようなプロジェクトでは、応用領域毎の機能材料に分けられたグループで新規な安定相の探索、反応過程の可視化、反応経路の制御、安定化手法の研究開発をコンセプト実証レベル（POCレベル）で行い、得られたデータや知見の共有化、材料の機能性の起源の明確化、新たな学理としての知識体系化を行っていく。このような形のプロジェクトとしては、文部科学省やJSTでの施策が考えられ、POCレベルの研究は3～5年で行うのが適当と考えられる。一方、学理の構築に関しては、応用領域を横断して未開拓領域の材料設計、プロセス設計の指針になるようなものを導くために長期の検討が必要であり、5～10年で行うことが望ましい。また、共有化された知見に基づく新機能安定相の設計手法の構築、新規のその場観察機器、実証プロセス装置、新規プロセス（反応経路の動的制御手法と安定化手法）の開発、実用的な新機能材料の創製を行うことも産業上重要である。これらの研究開発は基礎研究に留まらず具体的な応用に向けた開発も重要になると考えられるため、内閣府や経済産業省も加わって5年程度の期間の府省連携プロジェクトとして行うことが考えられる。プロジェクトの形態としては新規施策として行うこともできるが、例えば第2期SIPの「統合型材料開発システムにおけるマテリアル革命」の中で、新たな研究開発課題として追加していくことも可能と考えられる。

さらに、これらのプロジェクト間で新たな安定相に関する特性データや作製プロセスに関わる知見について情報共有できれば、日本全体として効率的な研究開発が可能になると考えられ、府省による共通のガバナリングボードの設置などが求められる。これにより、データ共有やプロジェクト間の連携が進めば、国内の少ないリソースでも世界をリードする新材料創製が期待される。

一方、本提案で取り上げている未開拓材料創製への取り組みに関する研究開発の領域は広範かつ課題也多岐に亘っているため、これら全体を一つのプロジェクトとして大きな予算で一気に進めることは容易ではない。このため、いくつかの視点に分けて施策を実施していくことも必要と考えられる。例えば、特定の技術レイヤーを中心に他の技術レイヤーを統合する形で研究開発テーマを設定するものや、安定相の形成方法・制御手法に分けてテーマを設定するものなどが考えられる。前者の例としては、①作製プロセスを中心にして理論とデータ科学との連携により効率的で確実性の高い作製プロセスを構築するような「プロセス・インフォマティクス」、②計測技術を中心に作製プロセスとデータ科学の連携によるプロセス中の反応過程や現象の正確な把握を行う「オペランド計測」、③理論を中心にデータ科学と特性評価との連携により材料に望みの機能を付加していくような「機能設計」、などのプログラムが考えられる。また、後者の例としては、④多元素化の中でも等量のホスト元素により構造の安定化や複数機能の共存を図る「ハイエントロピー化」、⑤作製プロセス中の前駆体形成や触媒作用など反応素過程の精密な制御による「反応経路制御」、⑥材料作製に用いる基板の結晶構造・面方位の選択や、作製プロセス中の圧力や歪みストレスの印加、微量な元素の添加などによる「プロセス制御手段による安定化」、などのプログラムが考えられる。

本提案では、単一の組成・構造からなる多様な安定相について主に取り上げ、その材料探索範囲を飛躍的に拡大させることの必要性を訴えてきたが、その次の段階として、単一の安定相だけでなく、複数の安定相が混在するような材料や、複数の安定相の境界（結晶粒界など）の制御、複数の異なる組成・構造の複合化（複合材料）などへ、拡張していくことも考えていく必要がある。これらについては、考えるべきパラメータがさらに増加して複雑化していくが、今回の提案で形成される新たなコミュニティや研究プロジェクトの中で、次のステップとしてどのような戦略、研究の方向性、体制をもって取り組むべきか、さらに検討を進めていくことが望まれる。

付録 1. 検討の経緯

- ・JST 研究開発戦略センター（CRDS）では、2018 年度に戦略プロポーザルを作成すべきテーマの候補を CRDS 戦略スコープ 2018 策定委員会において指定し、2018 年 4 月に CRDS 内に検討チームを発足させた。その後、検討チームにおいて提言作成へ向けた調査・分析・検討を重ねた。
- ・チームの活動では、調査によって国内外の研究開発動向・技術水準を明らかにしながらスコープの焦点を絞り、その過程において提言の方向性を検討するため、以下の有識者へのインタビュー・意見交換を実施した。
- ・その上で、新機能材料創製の研究開発に関して CRDS が構築した仮説を検証する目的で、科学技術未来戦略ワークショップを開催した（詳細次頁）。ワークショップの結果は報告書として、2019 年 3 月に CRDS より発行している（CRDS-FY2018-WR-11）。
- ・CRDS では以上の調査・分析の結果と、ワークショップにおける議論等を踏まえて、2019 年 7 月に本戦略プロポーザルを発行するに至った。

■意見交換・インタビューを実施した識者

（敬称略、所属・役職は実施時点）

安達 千波矢	九州大学 最先端有機光エレクトロニクス研究センター	センター長
足立 吉隆	名古屋大学大学院 工学研究科	教授
阿部 竜	京都大学大学院 工学研究科	教授
雨宮 慶幸	東京大学	名誉教授
栗野 博之	豊田工業大学大学院 情報記録工学研究室	教授
石原 達己	九州大学大学院 総合新領域学府	教授
乾 晴行	京都大学大学院 工学研究科	教授
大村 孝仁	物質・材料研究機構 構造材料研究拠点	副拠点長
尾鍋 研太郎	東京大学	名誉教授
陰山 洋	京都大学 工学研究科	教授
加藤 隆史	東京大学大学院 工学系研究科	教授
寒川 義裕	九州大学 応用力学研究所	教授
菅野 了次	東京工業大学大学院 総合理工学研究科	教授
北川 宏	京都大学大学院 理学研究科	教授
鯉沼 秀臣	東京工業大学	名誉教授
古山 通久	物質・材料研究機構 ナノ材料科学環境拠点	ユニット長
末國 晃一郎	九州大学大学院 総合理工学府	准教授
杉本 諭	東北大学大学院 工学研究科	教授
杉本 学	熊本大学大学院 先端科学研究部	准教授
関根 泰	早稲田大学理工学術院 先進理工学部	教授
高田 和典	物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点	拠点長
知京 豊裕	物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点	副拠点長
筑本 知子	中部大学 超伝導・持続可能エネルギー研究センター	教授

秦 誠一	名古屋大学大学院 工学研究科	教授
一杉 太郎	東京工業大学 物質理工学院	教授
細野 秀雄	東京工業大学 元素戦略研究センター	教授
福島 孝典	東京工業大学 科学技術創成研究院	教授
藤田 静雄	京都大学大学院 工学研究科	教授
水口 佳一	首都大学東京 物理学専攻	准教授
町田 正人	熊本大学大学院 自然科学研究科	教授
松下 裕秀	名古屋大学大学院 工学研究科	教授
宮山 勝	東京大学大学院 工学研究科	教授
森 孝雄	物質・材料研究機構 機能性材料研究拠点	グループリーダー
吉田 亮	統計数理研究所	教授

■科学技術未来戦略ワークショップ「多様な安定相からの高機能材料創製」プログラム

(敬称略)

開催日時：2018年12月16日（日）10:00～17:30

開催会場：JST 東京本部別館 2階会議室 A

10:00～10:05	開会挨拶	曾根 純一（JST-CRDS）
10:05～10:20	ワークショップの開催趣旨と骨子案の説明	小名木 伸晃（JST-CRDS）
10:20～12:00	（話題提供1）新たな機能を有する材料の検討、設計方法	
10:20～10:45	高機能特性相を高効率に探索する方法の開拓	一杉 太郎（東工大）
10:45～11:10	多様な安定相を活用した熱電変換材料の開発	森 孝雄（NIMS）
11:10～11:35	原子価制御と物質設計－異常原子価準安定物質の相転移による機能特性発現－	島川 祐一（京大）
11:35～12:00	マテリアルズ・インフォマティクスでできること	伊藤 聡（NIMS）
12:55～13:45	（話題提供2）応用からの期待	
12:55～13:20	化合物太陽電池の高効率化と材料設計	反保 衆志（産総研）
13:20～13:45	磁性材料における相反する機能の両立	杉本 諭（東北大）
13:45～15:25	（話題提供3）望みの安定相を実現するための計測技術とプロセス制御技術	
13:45～14:10	プロセス中のその場計測技術	大和田 謙二（量研機構）
14:10～14:35	半導体における結晶相の制御	藤田 静雄（京大）
14:35～15:00	プロセスインフォマティクスの活用	寒川 義裕（九大）
15:00～15:25	ハイエントロピー・ナノ合金の創製と作製プロセス技術の確立を指して	北川 宏（京大）
15:40～17:25	総合討論	ファシリテーター 佐藤 勝昭（JST-CRDS）

1. 要求される機能を実現する新たな安定相を探索・設計する手法
(元素、元素間結合状態、歪み、不純物などの役割の理解と設計指針の構築など)
2. 新たな安定相を実現する作製プロセスの設計手法
(前駆体、基板、外場、触媒などの効果の理解と制御、プロセス・インフォマティクスを活用など)
3. 効果的な研究開発の仕組み
(材料設計、プロセス設計、計測・評価技術、データ科学の連携など)
4. その他 (学会連携による新たなコミュニティの形成など)

17:25 ~ 17:30 閉会挨拶

曾根 純一 (JST-CRDS)

招聘識者 (敬称略、所属・役職は開催時のもの)

(発表者)

- ・大和田 謙二 量子科学技術研究開発機構 量子ビーム科学研究部門 上席研究員
- ・伊藤 聡 物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点 拠点長
- ・北川 宏 京都大学大学院 理学研究科 教授
- ・寒川 義裕 九州大学 応用力学研究所 教授
- ・島川 祐一 京都大学 化学研究所 教授
- ・杉本 諭 東北大学大学院 工学研究科 教授
- ・反保 衆志 産業技術総合研究所 太陽光発電研究センター 主任研究員
- ・一杉 太郎 東京工業大学 物質理工学院 教授
- ・藤田 静雄 京都大学大学院 工学研究科 教授
- ・森 孝雄 物質・材料研究機構 機能性材料研究拠点 グループリーダー

(コメンテータ)

- ・大場 史康 東京工業大学 物質理工学院 教授
- ・加藤 仁一郎 旭化成株式会社 上席理事・研究開発センター長
- ・平田 裕人 トヨタ自動車株式会社 先端材料技術部 部長
- ・本間 格 東北大学 多元物質科学研究所 教授

付録2. 国内外の状況

新機能材料の創製に関連した海外の動向としては、エネルギー関連材料、構造材料など応用分野を横断した多元素材料やハイエントロピー材料の国際会議が活発化している。例えば、多元素材料の国際会議として、「21st International Conference on Ternary and Multinary Compounds (ICTMC-21)」[September 9-13, 2018 in Boulder, Colorado, USA] が開催されており、応用分野としては太陽光発電、熱電発電、電池、発光体、機能材料、超伝導体に亘り、3元および多元素の化合物に関連するすべてのトピックをカバーしている。この年のテーマは非平衡プロセスとなっており、材料そのものの特性だけでなく、多元素系の作製プロセスへの関心も高まっている。また、最近ではハイエントロピー合金に関するシンポジウムが増えてきており、TMS (The Minerals, Metals & Materials Society) や MRS (Material Research Society) などの定期大会だけでなく、「International Conference on High-Entropy Materials (ICHEM 2018)」[February 19-20, 2018 in Paris, France] など独立した国際会議としても多数開催されている。このようにハイエントロピー合金に関する研究が世界的に活況を呈している。一方、ハイエントロピー合金の概念を熱電材料の高性能化に生かそうとする取り組みも始まっている。ハイエントロピーの混合系は、bcc や fcc の結晶構造を取り易く、バンドの縮退のためにゼーベック係数が大きくなる傾向がある。また、大きな単位胞の影響、同一サイトに異種元素が入る乱れのために熱伝導率が低くなる傾向にある。これらの特徴は熱電材料の開発戦略とも重なっており、興味を持たれている。

国内においては、1986年に多元素系の半導体材料を対象にした「三元・多元機能性材料研究会」が応用物理学会の中に作られ、現在では「多元素系化合物・太陽電池研究会」として、化合物太陽電池、透明導電膜、熱電発電、光触媒、スピントロニクスなど多元素の化合物に関する知識および技術の向上・発展を目指した活動を行っている。また、ハイエントロピー合金に関する活動としては、平成30年度に新学術領域「ハイエントロピー合金：元素の多様性と不均一性に基づく新しい材料の学理」[平成30年度～令和4年度] が立ち上げられている。また、日本金属学会で2018年秋に「ハイエントロピー合金の材料科学」のシンポジウム開催、日本機械学会誌の2018年3月号で【特集：注目の新規金属材料「高エントロピー合金」】が掲載、といった活動があり、ハイエントロピー合金に対する関心が高まってきている。

このように国内外において、多元化合物やハイエントロピー合金に関しては応用分野を越える活動として活発化しているが、本プロポーザルのように、未開拓の材料創製空間への展開といった視点を持つものはなく、さらに材料設計、作製プロセス設計を同時に考えて、多様な安定相の動的制御、およびプロセス制御手段による準安定相や不安定相などの安定化による新材料創製を行っていくような活動や施策・プロジェクトはまだ存在しない。

図 S2-1 に準安定相またはハイエントロピーに関する材料開発の論文検索を行った結果を示す。ここでは、Scopus の2000年～2018年のデータベースを用い、論文検索式としては以下を用いた。

(“metastable phase*” OR “metastable-phase*” OR “high entropy” OR “multinary”) AND (material* OR crystal* OR compound*)

2012年頃から論文の急激な増加が見られているのがわかる。また、国別としては、中国がトップであり、米国、ドイツと続き、日本は4位になっており、我が国も世界と伍している状況と言える。このような論文状況に加え、2018年度から開始されたハイエントロピー合金の新学術領

域など、学会での関心も高まっていることから、日本でもこれから研究がますます活発になると
 思われる。この機会に本プロポーザルの提案に沿った施策を実施することにより、さらに広い範
 囲の材料研究者を取り込むとともに、理論、計測・評価、データ科学など他の分野の研究者も加
 わって、新たな研究開発の方向に向かせることができ、世界に先駆けて新たな研究の流れと学理
 の構築、さらには我が国の新材料開発スピードの向上が図れるものと期待される。

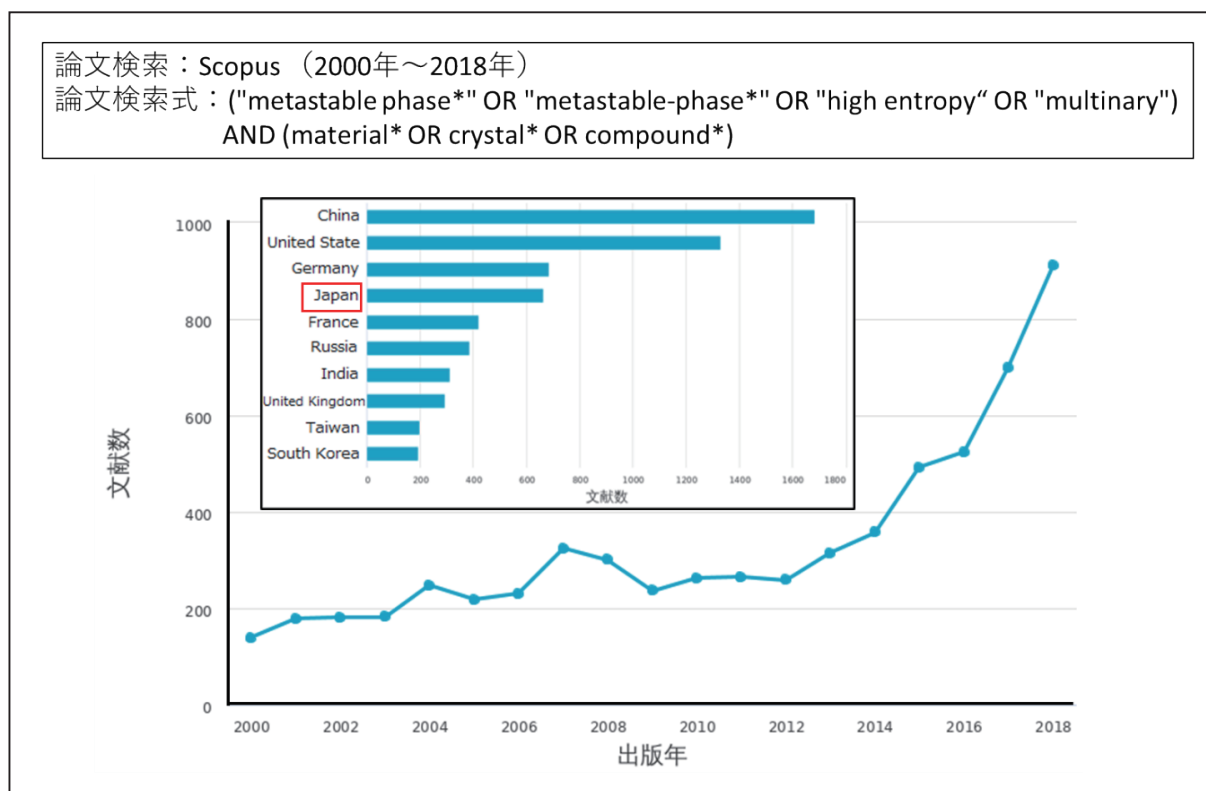


図 S2-1 準安定相、ハイエントロピー、多元素に関する材料開発の論文動向

付録3. 専門用語説明

1. 安定相：ここでは、材料を使用する時間範囲で、その構造や特性が大きく変化せず使用できる材料の状態を指しており、最もエネルギーの低い最安定の状態だけでなく、多様な準安定相も含めて安定相としている。
2. 準安定相：エネルギー的に最も安定した状態（最安定相）ではないが、一定の条件下では安定して存在できる相であり、一般的に多数存在する。例えば、炭素からなるグラファイトは最安定相であり、ダイヤモンドやフラーレン、カーボンナノチューブは準安定相である。
3. エントロピー：熱力学、統計力学における物体や熱の状態を表す指標であり、熱力学においては断熱条件下での不可逆性を表す指標として導入され、統計力学においては微視的な「乱雑さ」の尺度となっている。ここでは、異種の元素が混ざることによる混合や配置のエントロピーを意味している。
4. プロセス制御手段：ここでは材料の作製過程において安定相の決定に影響を与えるプロセス制御のやり方を指す。制御手段としては、基板、添加物、圧力、温度、前駆体、触媒などが考えられる。作製プロセス中にこれらを制御することで準安定相／不安定相をより安定な方向に変化させ、プロセス終了後も安定な構造を保つ。
5. コンビナトリアル手法：効率的な材料探索を目的に、多元素（多成分）の様々な成分比（組成）の多様な構造を、同時に作製する手法を指す。例えば、複数のソース（原料）を同時にスパッタリングし、基板の場所による組成の違いを作り出す。
6. 電位窓：ある電気化学系（溶媒・支持塩・電極の組み合わせ）において、有意義な電気化学反応・測定が可能な電位領域のことを示す。
7. マテリアルズ・インフォマティクス：データマイニングなどの情報科学を通じて新材料や代替材料を効率的に探索する取り組み。
8. プロセス・インフォマティクス：材料の作製プロセスにおいて、プロセス中の反応過程の詳細な測定データの収集と、作製した材料の様々な物理的・化学的な特性データを基に、情報科学を通じて新材料作製のプロセス開発を効率的に行うこと。
9. 機械学習：コンピュータ（機械）を用いて、人間が自然に行うパターン認識や経験則を導き出す活動などを行うものであり、学習の基になる多くのデータを与えることで学習し、学習後に最適な認識や判断が行える。
10. 深層学習：多層のニューラルネットワークによる機械学習の手法である。近年、コンピュータの性能向上もあり、音声認識・画像認識・自然言語処理など多様な応用分野で関心が高く、利用が進んできている。
11. 第一原理計算：量子力学の原理に基づき、電子の質量、電荷やクーロン力などの基本物理量から物性を直接導く計算のこと。実験値に合わせるためのパラメータの導入や安易なモデル化などをせず、基本原理から直接物性を導き出す。
12. ハイエントロピー合金：5種類以上の異なる元素を等量で混ぜ合わせて作製する新しい概念の合金であり、結晶の各格子点に入る元素の配置エントロピーが高いことからこの名前が付けられている。強度と靱性が高いなどの相反するような特徴も有しており、世界で研究が活発化している。
13. ベイズ最適化：一般的には、形状がわからない関数（ブラックボックス関数）の最大値（ま

たは最小値)を求めるための手法であるが、ここでは多次元の作製プロセスのパラメータがあっても、網羅的探索に比べて圧倒的に少ない試行回数で最適な条件を探し出す手法を指す。

14. オペランド計測:オペランド「Operando」はラテン語で“working”, “operating”を意味し、動作中の触媒やデバイスを直接計測する手法である。触媒反応、水の光分解、タンパク質の光合成、半導体やメモリ、太陽電池などの実デバイス動作中のオペランド観測は必須の計測手段となっている。

■戦略プロポーザル作成メンバー■

総括責任者：曾根 純一	上席フェロー（ナノテクノロジー・材料ユニット）
リーダー：小名木 伸晃	フェロー（ナノテクノロジー・材料ユニット）[2019年3月まで]
メンバー：馬場 寿夫	フェロー（ナノテクノロジー・材料ユニット） [2019年4月よりリーダー]
小林 恵	主査（プログラム戦略推進室）
佐藤 勝昭	特任フェロー（ナノテクノロジー・材料ユニット）
杉浦 晃一	調査員（未来創造研究開発推進部）[2019年3月まで]
永野 智己	フェロー（ナノテクノロジー・材料ユニット）
丹羽 洋	技術移転プランナー（産学連携展開部）
宮下 哲	フェロー（ナノテクノロジー・材料ユニット）
八木岡 しおり	フェロー（海外動向ユニット）

※お問い合わせ等は下記ユニットまでお願いします。

CRDS-FY2019-SP-02

戦略プロポーザル

未来材料開拓イニシアチブ

～多様な安定相のエンジニアリング～

STRATEGIC PROPOSAL

Future Materials Exploring Initiative
- Engineering for Diverse Stable Phases -

令和1年7月 July, 2019

ISBN 978-4-88890-647-0

国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター
ナノテクノロジー・材料ユニット

Nanotechnology/Materials Unit,

Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

〒102-0076 東京都千代田区五番町 7

電話 03-5214-7481

ファックス 03-5214-7385

<https://www.jst.go.jp/crds/>

© 2019 JST/CRDS

許可無く複写／複製することを禁じます。

引用を行う際は、必ず出典を記述願います。

No part of this publication may be reproduced, copied, transmitted or translated without written permission.
Application should be sent to crds@jst.go.jp. Any quotations must be appropriately acknowledged.

ATTAATC A AAGA C CTAAC T CTCAGACC

CT CTCGCC AATTAATA

TAA TAATC

TTGCAATTGGA CCCC

AATTCC AAAA GGCCTTAA CCTAC

ATAAGA CTCTAACT CTCGCC

AA TAATC

AAT A TCTATAAGA CTCTAACT CTAAT A TCTAT

CTCGCC AATTAATA

ATTAATC A AAGA C CTAAC T CTCAGACC

AAT A TCTATAAGA CTCTAACT

CTCGCC AATTAATA

TTAATC A AAGA C CTAAC T CTCAGACC

AAT A TCTATAAGA CTCTAACT

ATTAATC A AAGA C CT

GA C CTAAC T CTCAGACC

0011 1110 000

00 11 001010 1

0011 1110 000

0100 11100 11100 101010000111

001100 110010

0001 0011 11110 000101

ISBN 978-4-88890-647-0

